Statisztikus módszerek a diszlokáció dinamikában

A doktori értekezés tézisei

Ispánovity Péter Dusán

Témavezető:
Dr. Groma István
egyetemi tanár
az MTA doktora

ELTE TTK Fizika Doktori Iskola
Iskolavezető: Dr. Horváth Zalán, az MTA rendes tagja

Anyagtudomány és szilárdtestfizika program
Programvezető: Dr. Lendvai János, az MTA doktora

Eötvös Loránd Tudományegyetem
Természettudományi Kar
Anyagfizikai Tanszék
2009.

Bevezetés

Kristályos anyagok plasztikus deformációja az esetek túlnyomó többségében diszlokációk kollektív mozgásával valósul meg. Ezek a lineáris rácshibák $1/r$ típusú, azaz hosszú hatótávolságú mechanikai feszültségteret keltenek, ezen keresztül kölcsönhatnak, mozgásuk pedig rendszerint egy csúszósíkhoz van kötve. Ezáltal ezek a rendszerek erősen csatoltak, és dinamikájuk is sok szempontból különleges. Példaként említhetjük a kristályban kialakuló diszlokáció mintázatokat ill. a diszlokáció lavinákat. Mivel ezek a jelenségek szoros kapcsolatban állnak a kristály által adott plasztikus válasszal, megértésük kulcsfontosságú az anyagtudományban.

A mérnöki gyakorlatban a plasztikus deformációt fenomenologikus modellekkel írják le, melyek rendszerint a feszültség, a deformáció, a deformációs sebesség és a diszlokáció sűrűség között adnak meg konstitutív összefüggéseket. Ezek a modellek kielégítő eredményt adnak kellően általános feltételek és nagy mintaméretek mellett. Kiderült azonban, hogy amint valamely a deformációra vagy az anyagra jellemző méretskála (benyomófej mérete, minta valamely mérete, szemcseméret, kiválások mérete stb.) megközelíti az 1 μm-t, a mért mechanikai tulajdonságok jelentősen eltérnek a klasszikus modellek által jósoltaktól. Ezt a jelenséget a plaszticitás elméletben mérethatásnak nevezik.

A nanotechnológia rohamos fejlődésével éppen a kis méretű minták vizsgálata került az érdeklődés középpontjába. A mérethatások figyelembevételére nemlokális fenomenologikus modelleket dolgoztak ki, melyek sok szempontból sikeresnek bizonyultak (pl. képesek leírni a kis méretből fakadó keményedést, ill. a diszlokáció mintázatok néhány típusát). Ezen modellek nagy hátránya, hogy azt a tényt, hogy a plasztikus deformáció egyedi diszlokációk mozgásával valósul meg, nem tartalmazzák. Ehelyett gradiens tagok együtthatóiként olyan hosszúság dimenziójú paraméterek jelennek meg, melyek eredete nem tisztázott. Ezért számos olyan diszlokáció mechanizmuson alapuló jelenség van, melyekről ezen modellek nem lehetnek képesek számot adni. Kiderült például, hogy a μm-es átmérőjű egykristály rudak plasztikus deformációja lényegesen különbözik a makroszkopikus mintáknál megszokottól. A deformáció elkülönülő régiókban lavinaszerűen megy végbe. Ez többek között meggátolja a mikronos átmérőjű vékony drótok megjósolható alakítását.

Az utóbbi másfél évtizedben egyre gyakrabban vizsgálják a diszlokáció rendszerek viselkedését statisztikus fizikai módszerekkel. Sikerült például elméleti számolásokkal igazolni a gradiens tagok létjogosultságát, modelleket adni a lavinaszerű viselkedésre és a plasztikus folyásra. A dolgozatban bemutatott eredmények is ebben a témakörben születtek.

A munka célkitűzései

1. A diszlokációk a kristályos anyagot ért hatások függvényében meglepően sokféle mintázatba rendeződnek. Ezek közül talán a legtöbbet a fárasztás során létrejövő állandósult csúszási sávokat vizsgálták. Diszkrét szimulációkkal korábban még a folyamat legelején megjelenő mátrix struktúrát sem sikerült kielégítően modellezni. Mindeközben számos, a sávok kialakulására kidolgozott modell a vakancia és intersticiális típusú dipólok közötti energiakülönbségre épül. A diszkrét szimulációk minden esetben a lineáris rugalmasságtanra épülnek, azonban ebben az esetben az említett energiakülönbség zérus. A megoldás az lehet, ha a szimulációkban túl tudunk lépni a lineáris rugalmasságtanon, ehhez azonban egy zárt alakban kifejezett kölcsönhatási erő levezetésére van szükség.

2. A diszlokációk hosszú hatótávolságú feszültségtereken keresztül hatnak kölcsön, ami azt jelenti, hogy N diszlokáció esetén a diszkrét dinamikai algoritmus $\mathcal{O}(N^2)$ műveletigényű. A numerikus program gyorsítására ad lehetőséget a Groma István és Bakó Botond által kidolgozott sztochasztikus eljárás, melynek központi mennyisége a feszültség eloszlása a kristály pontjaiban. Ennek alakját korábban már sikerült meghatározni, azonban csak abban az esetben, amikor a rendszerre nem hat külső feszültség. A gyakorlati alkalmazások szempontjából azonban létfontosságú lenne az alkalmazott feszültség figyelembevétele.

3. Korábbi vizsgálatok alapján egyértelművé vált, hogy a diszlokáció korrelációk nem hanyagolhatók el, és számos más fizikai mennyiségre hatással vannak. A

rendszer dinamikájának jobb megértése végett szükséges a korrelációk időfejlődésének pontos leírása.

4. Groma István és munkatársai kidolgoztak egy kontinuum modellt egyszeres csúszás esetén. A modell rendkívül pontos egyezést mutat a diszkrét szimulációk eredményeivel. Sajnos többszörös csúszásra történő általánosítás, mely a gyakorlati alkalmazások szempontjából nélkülözhetetlen, korántsem triviális. Az egyszeres csúszásnál megalkotott módszer nem ismételhető meg.

   Groma Istvánnak és Györgyi Gézának sikerült a teljes kontinuum elméletet újrafogalmazni egy variációs elmélet keretei között, mely egy szabadenergia jellegű termodinamikai potenciálon alapul. Ez a módszer már elvben lehetőséget ad a többszörös csúszás bevezetésére. A dolgozatban erre teszünk kísérletet.

5. Diszlokációk véletlen állapotból történő relaxációjával korábban csak érintőlegesen foglalkoztak. A tudományos érdeklődés középpontjában álló diszlokáció lavinák megértéséhez azonban érdemben járulhatnának hozzá a relaxációval kapcsolatos ismeretek. A lavinák során ugyanis, a külső feszültség hatására néhány diszlokáció kiszakad egyensúlyi helyzetéből, és ettől az egész rendszer mozgó állapotba kerül. Innen a folyamat feltehetően relaxációval jól közelíthető. A dolgozatban ezért ilyen folyamatok tanulmányozásával is foglalkozunk.

Az alkalmazott módszerek

Az egyedi diszlokációk tulajdonságai évtizedek óta ismertek. Egy diszlokáció rendszer makroszkopikus viselkedését azonban döntően befolyásolják a diszlokációk mikroszerkezetének statisztikus tulajdonságai. Wilkens révén a hatvanas évek óta tudjuk, hogy a diszlokációk nem véletlenszerűen helyezkednek el a kristályban. Az ilyen térbeli korrelációk pontos leírása és vizsgálata ezért nem csupán elméleti, de gyakorlati szempontból is szükséges.

A diszlokáció szerkezet megismerésének manapság leggyakrabban alkalmazott módszere a számítógépes szimuláció. Habár már léteznek három dimenziós programok is, ezek használhatósága még sok szempontból korlátozott, és kiderült, hogy a két dimenziós változatok sok tekintetben ekvivalens eredményt adnak. Ez utóbbi, matematikai szempontból lényegesen egyszerűbb esetben pedig analitikus számolások elvégzésére is lehetőség van, ezáltal az elméleti jóslatok numerikus úton közvetlenül ellenőrizhetőek. A dolgozatban mi is ezt az utat követjük, és minden elméleti eredményt az általunk készített két dimenziós diszkrét dinamikai szimuláció segítségével igazoljuk.

Tézispontok

1. A nemlineáris rugalmasságtan bevezetése végett, újrafogalmaztuk a Kröner–Kosevich-féle kontinuum modellt egy variációs elméletté. A benne megjelenő entalpia funkcionál megadása lényegében a rugalmas feszültség és a rugalmas deformáció közötti összefüggést rögzíti. Az anharmonikus esethez tartozó entalpia felírása után analitikus alakban fejeztük ki a két diszlokáció közötti erőhatást. A kapott konvolúciós integrált sikerült elvégeznem, így a kölcsönhatásra egy egyszerű, zárt képletet kaptam, melyben az anharmonicitás eredménye egy extra erőkomponens a harmonikus tag mellett. Az extra kölcsönhatás $1/r$-nél gyorsabban cseng le (azaz rövidtávú), és érdekesség, hogy benne, a lineáris esettel ellentétben, paraméterként megjelenik a diszlokációk magjánál fellépő belső levágási sugár [1].

   Kimutattuk, hogy a kapott anharmonikus kölcsönhatási tag esetén a homogén diszlokáció eloszlás instabil, és valóban egy karakterisztikus hosszal jellemezhető mintázat alakul ki. Ez a hosszparaméter az átlagos diszlokáció távolsággal arányos. Diszkrét dinamikai szimulációkat végeztem az új kölcsönhatási taggal és az elméleti jóslatokkal megegyező eredményre jutottam, azaz egy jól definiált karakterisztikus hosszal jellemezhető mintázat alakult ki [1].

2. Meghatároztam a belső feszültség eloszlását alkalmazott külső feszültség esetén. Az analitikus számolásokat a diszlokáció rendszer hipotetikus monodiszperz dipól közelítésében végeztem el. A kapott eredmény jó egyezést mutatott a numerikus szimulációkkal. Elmondható, hogy nagy feszültségek esetén az eredeti $1/|\tau|^3$-ös aszimptotikához egy külső feszültséggel arányos $1/(\tau|\tau|^3)$-os

járulék adódik. A numerikus eredmények alapján kiderült, hogy a rendszerben található dipólok és multipólok leárnyékolják a külső feszültséget, és végeredményben egy effektív külső térrel számolhatunk, mely kb. fele a valódi térnek [2].

3. A különböző rendű diszlokáció sűrűségek időfejlődésére korábban Groma István levezetett egy BBGKY hierarchiát. Ezt a Kirkwood közelítés alkalmazásával a második szinten zártam le, így a korrelációs függvényekre nézve zárt evolúciós egyenletekhez jutottam. Kiderült, hogy a kapott egyenletek nagyon hasonlítanak azokhoz, melyek egy árnyékolt diszlokáció körüli sűrűségeket írják le. Ez azt jelenti, hogy diszlokációk esetén is igaz a lineáris válasz elmélet, azaz a korrelációs függvények és az árnyékolt terek ekvivalenciája. A numerikus szimulációk minden tekintetben alátámasztották az elméleti jóslatokat [3].

4. Az egyszeres csúszás kontinuum elmélete egy megfelelő szabadenergia jellegű funkcionálból származtatható. A funkcionál szimmetriaelvek alkalmazásával általánosítható többszörös csúszás esetére. Szimmetrikus kétszeres csúszás (azaz egymásra merőleges csúszósíkok) esetén a funkcionálban csak egy ismeretlen paraméter szerepel. Az egyenletek analitikus egyensúlyi megoldása csak egy közelített esetben adható meg, nevezetesen, amikor a diszlokáció sűrűség a térben mindenütt közel konstans. Kiderült, hogy ekkor az indukált előjeles sűrűségek a távolság második hatványával csengenek le, ami azt is jelenti, hogy a korrelációk rövidtávúak. Ez az eredmény az alkalmazott közelítés ellenére nagyon jól illeszkedik a numerikus szimulációkból kapott adatokra.

5. Numerikus vizsgálatok során kiderült, hogy a véletlenszerű állapotból történő relaxáció lassú, abban az értelemben, hogy több dinamikai mennyiség, így a sebességek különböző hatványainak átlaga, hatványfüggvényszerű lecsengést mutat. Ez a skálázó tulajdonság egy „bekapcsolási” idő után teljesül, és egy a rendszermérettel arányos időpontig tart [4]. Megmutattam, hogy a viselkedés hátterében az áll, hogy a sebességek különböző időpontokban mért eloszlása összeskálázható. Többszörös csúszás esetén a relaxáció gyorsabb, és a skálázási argumentum nem teljesül.

Következtetések

- Bemutattuk, hogy a diszlokáció-diszlokáció korrelációk számos diszlokáció rendszereket leíró fizikai mennyiségre (így a feszültségeloszlásra, a sebességeloszlásra és a kialakuló mintázatokra) döntő hatással vannak. Részletesen tanulmányoztuk a korrelációs függvények dinamikáját, és a több csúszósíkos esetet. Ilyen diszlokáció korrelációkkal kapcsolatos átfogó vizsgálatot korábban nem végeztek az irodalomban.
- A diszlokációk nulla hőmérsékletű speciális dinamikájú nemkonzervatív rendszert alkotnak. A dolgozat eredményei alapján azonban számos statisztikus fizikában alkalmazott módszer, a megfelelő módosítások után, sikeresen alkalmazható.

A tézisek alapjául szolgáló közlemények

[1] I. Groma és P. D. Ispánovity, „Role of anharmonicity in dislocation patterning”, Phys. Rev. B **76**, 054120 (2007).

[2] P. D. Ispánovity és I. Groma, „The probability distribution of internal stresses in externally loaded 2D dislocation systems”, J. Stat. Mech., P12009 (2008).

[3] P. D. Ispánovity, I. Groma és G. Györgyi, „Evolution of the correlation functions in two-dimensional dislocation systems”, Phys. Rev. B **78**, 024119 (2008).

[4] F. F. Csikor, M. Zaiser, P. D. Ispánovity és I. Groma, J. Stat. Mech., „The role of density fluctuations in the relaxation of random dislocation systems”, P03036 (2009).